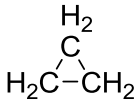
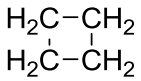
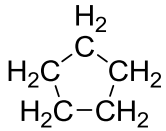
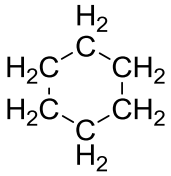
# Cycloalkane

allgemeine Summenformel: $C_nH_{2n}$







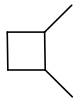


(Kurz)-Strukturformel

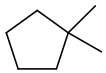
Cyclopropan | Cyclobutan | Cyclopentan | Cyclohexan

Nomenklatur: Vorsatz *Cyclo-* vor dem Wortstamm des entsprechenden Alkans (z.B. Cyclohexan)

Bsp. für substituierte Cycloalkane



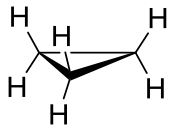
1,2-Dimethylcyclobutan



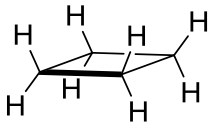
1,1-Dimethylcyclopentan

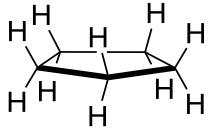

Dr. Gunnar Ehrlich
ehrlich@chemie.uni-hamburg.de

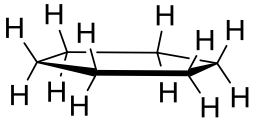
# Konformation von Cycloalkanen



Cyclopropan ist zwangsläufig eben

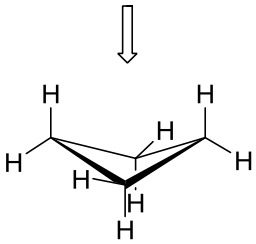


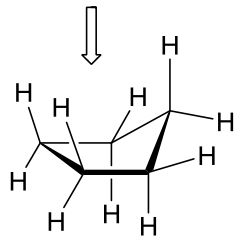


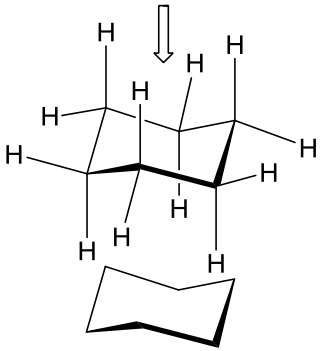


Cycloalkane ab C4 sind nicht mehr eben

„Umklappen“ einer Ecke







Konformation: Bestimmte geometrische Form, die ein Molekül durch Drehen um C-C-Einfachbindungen einnehmen kann. Es werden keine Bindungen gebrochen oder neu gebildet.

Bindungswinkel 88°

„Segel“

Bindungswinkel 105°

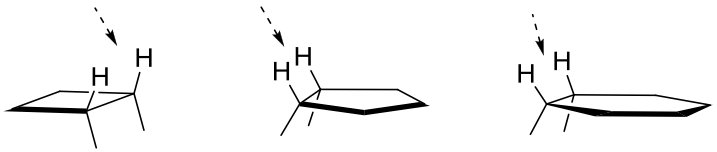
„Briefumschlag“

Bindungswinkel 109,5°

„Sesselkonformation“


Dr. Gunnar Ehrlich
ehrlich@chemie.uni-hamburg.de

# Konformationen von Cycloalkanen

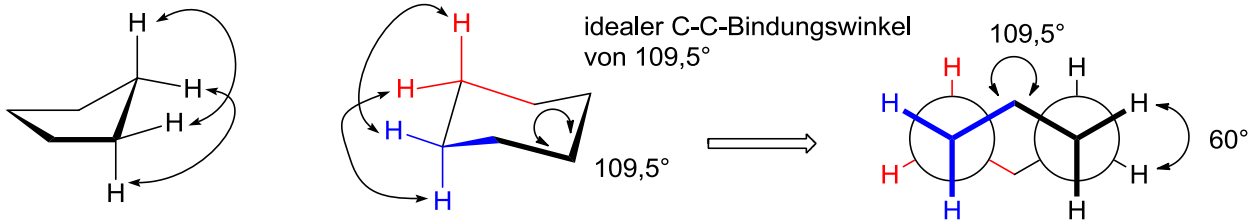


Innenwinkel 90° | Innenwinkel 108° | Innenwinkel 120°

In ebenen Cycloalkanen stehen alle benachbarten Wasserstoffatome ekliptisch.
→ energiereiche Anordnung (Torsionsspannung)

In größeren ebenen Ringen weichen die C-C-Bindungswinkel stark vom Optimum von 109,5° ab.
→ Ringspannung

Durch Änderung der Konformation können die Bindungs- und Torsionswinkel optimiert werden.



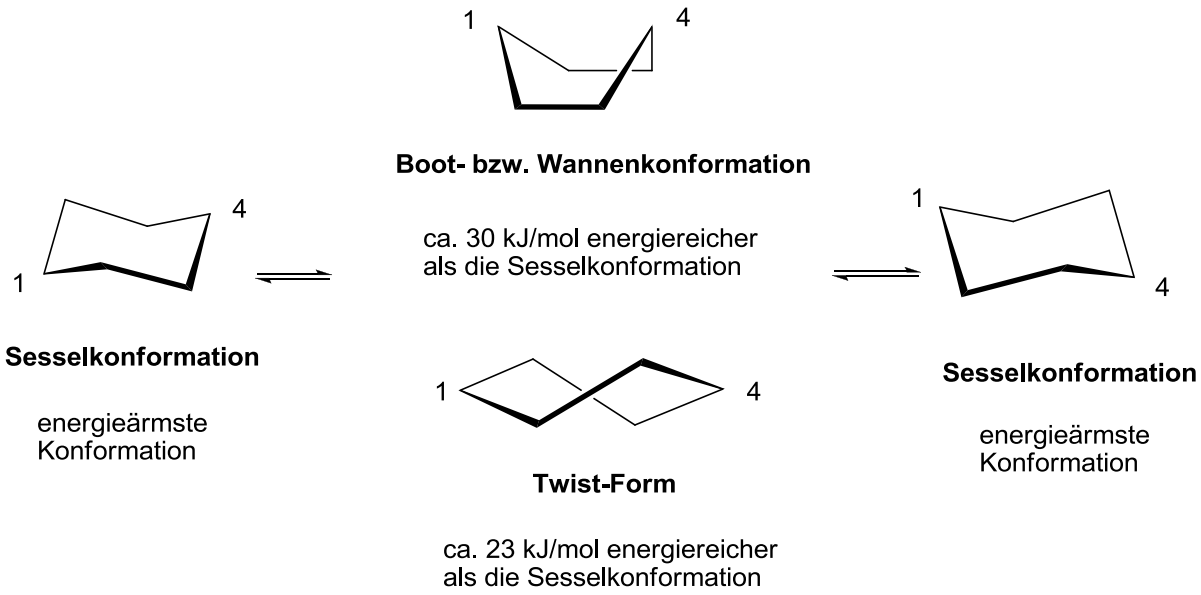

leicht gestaffelte Anordnung der Wasserstoffatome

ideal gestaffelte Anordnung der Wasserstoffatome

Newman-Projektion


Dr. Gunnar Ehrlich
ehrlich@chemie.uni-hamburg.de

# Konformationswechsel von Cyclohexan




Cyclohexan-Derivate sind mit Abstand am wichtigsten, daher erfolgt hier eine detailliertere Betrachtung.

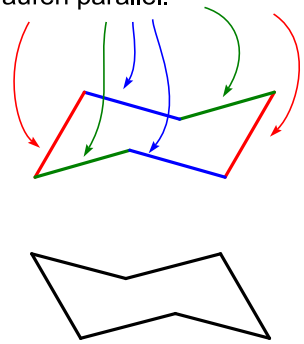
Von Cyclohexan existieren mehrere Konformere, die sich sehr rasch ineinander umwandeln können. Die Wannen- bzw. Twist-Konformation werden als energiereichere Übergangszustände bei der Umwandlung eines Sesselkonformers in das andere durchlaufen. Erst bei sehr tiefen Temperaturen wird der Konformationswechsel „eingefroren“.

# Zeichnen des Cyclohexan-Sessels

Beim Zeichnen des Sessels muss man einige Dinge beachten, damit die geometrische Anordnung der Bindungen korrekt ist.

## 1. Zeichnen des Grundgerüstes:

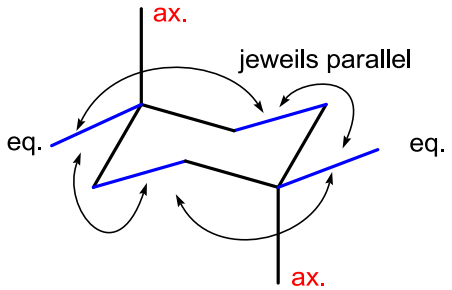
Die jeweils gegenüberliegenden Seiten verlaufen parallel.



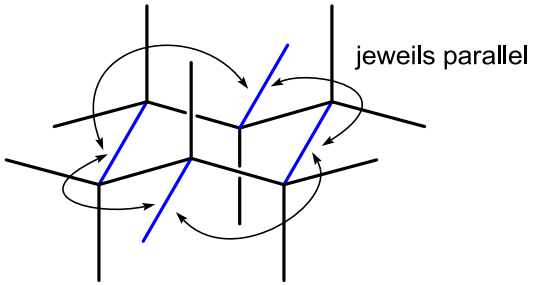
Die spiegelbildliche Darstellung ist völlig identisch

## 2. Zeichnen der Substituenten:

Jedes C-Atom besitzt 2 Substituenten, einen axialen (ax.) und einen äquatorialen (eq.).




1. Alle axialen Substituenten zeigen vertikal nach oben oder unten.
2. Die Bindungen zu den äquatorialen Substituenten liegen parallel zur übernächsten Seite des Sessels.

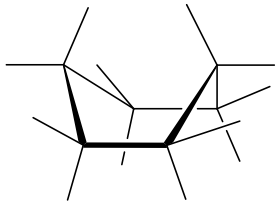


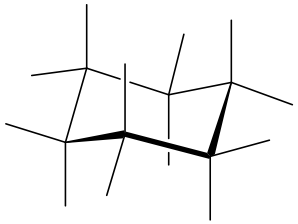

3. Das gilt auch für alle übrigen axialen sowie äquatorialen Substituenten.


Dr. Gunnar Ehrlich
ehrlich@chemie.uni-hamburg.de

# Konformationswechsel von Cyclohexan

Ursachen für den höheren Energiegehalt der Boot- und Twist-Konformeren:

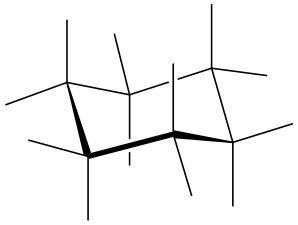


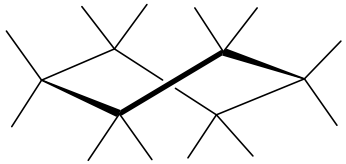


größtenteils ekliptische Anordnung der Wasserstoffatome

→ sterische Behinderung

→ höherer Energiegehalt



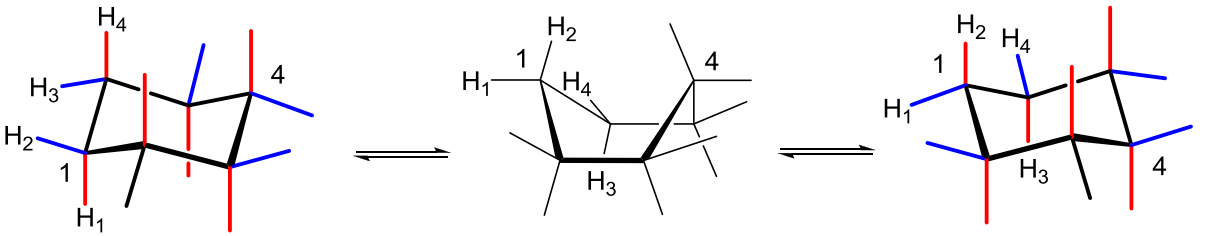


Insgesamt ist bei der Umwandlung beider Sesselkonformere ineinander eine Aktivierungsenergie von 46 kJ/mol notwendig.

# Konformationswechsel von Cyclohexan

axiale Substituenten

äquatoriale Substituenten



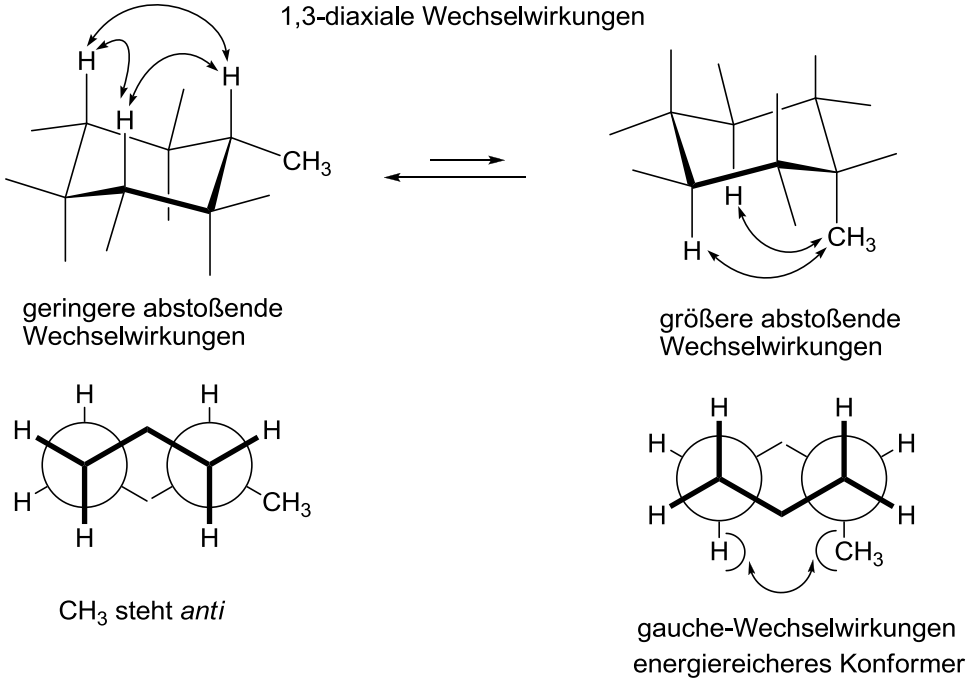

$H_1$ und $H_4$ axial
$H_2$ und $H_3$ äquatorial

$H_1$ und $H_4$ nun äquatorial
$H_2$ und $H_3$ axial

Bei der Umwandlung eines Sesselkonformers in das andere tauschen axiale und äquatoriale Substituenten ihre Positionen.


Dr. Gunnar Ehrlich
ehrlich@chemie.uni-hamburg.de

# Konformationswechsel von Cyclohexan

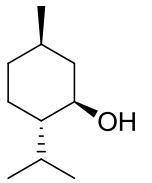



1,3-Diaxiale Wechselwirkungen treten zwischen mehreren axialen Substituenten auf und sind generell abstoßende WW.

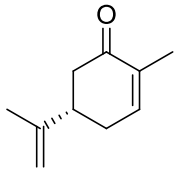
Bei substituierten Cyclohexanen nimmt der Substituent durch „Umklappen des Sessels“ bevorzugt eine äquatoriale Lage ein, da so abstoßende Wechselwirkungen verringert werden.

# Natürlich vorkommende Cycloalkane

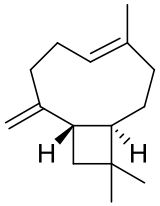
## Terpene



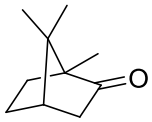

Menthol,
im Pfefferminzöl



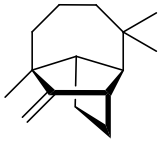

D-(+)-Carvon,
Kümmelgeruch




ß-Caryophyllen,
in ätherischen Ölen

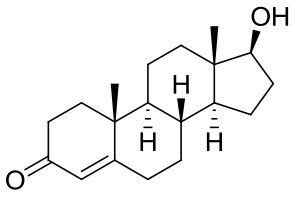



D-Campfer

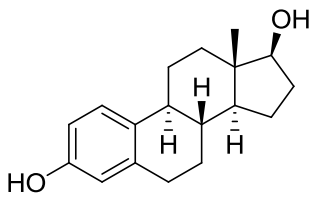


Longifolen,
in Terpentinöl

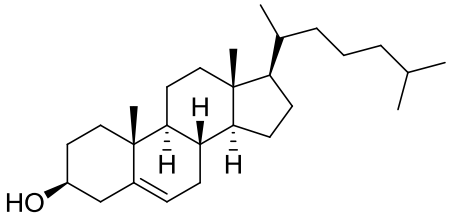
## Steroide



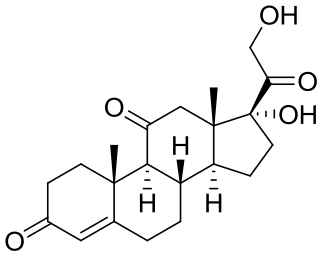

Testosteron




Östradiol




Cholesterin




Cortison


Dr. Gunnar Ehrlich
ehrlich@chemie.uni-hamburg.de